

образования термически стабильного фосфата кальция. При молярном соотношении содержаний $\text{Ca/P} = 2,3$ наблюдается полное подавление молекулярного поглощения PO . Добавление титана, согласно расчетам, приводит к устранению помех кальция, в результате образования в пламени конденсированного титаната кальция (CaTiO_3). Для полного устранения влияния кальция на молекулярное поглощение PO в пламени ацетилен-воздух оптимальное молярное соотношение титана к кальцию должно быть не менее, чем $\text{Ti/Ca} = 1.36$. Образование термически стабильного фосфата магния не нашло подтверждения при термодинамическом моделировании.

1. Пупышев А.А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ. М.: Техносфера, 2009. 784 с.

2. Huang M.D., Becker-Ross H., Florek S., Heitmann U., Okruss M. Determination of phosphorus by molecular absorption of phosphorus monoxide using a high resolution continuum source absorption spectrometer and an air-acetylene flame // J. Anal. Atom. Spectrom., 2006. V. 21. P. 338-345.

3. Huang M.D., Becker-Ross H., Florek S., Heitmann U., Okruss M. // The influence of calcium and magnesium on the phosphorus monoxide molecular absorption signal in the Determination of phosphorus using a continuum source absorption spectrometer and an air-acetylene flame // J. Anal. Atom. Spectrom., 2006. V. 21. P. 346-349.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФТОРА ПО МОЛЕКУЛЯРНОМУ ПОГЛОЩЕНИЮ GaF и AlF В ПЛАМЕНАХ

Зайцева П.В., Пупышев А.А.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

В работе [1] предложена методика прямого определения фтора по молекулярному поглощению компонент полосы GaF (211 и 214 нм) в пламени ацетилен-воздух с использованием атомно-абсорбционных спектрометров высокого разрешения с непрерывным источником спектра [2]. Наиболее чувствительные условия определения фтора были достигнуты при расходе ацетилена - 3.2 л/мин, расходе воздуха - 17 л/мин и высота наблюдения над горелкой - 14 мм.

Теоретическое изучение условий определения фтора по молекулярному поглощению GaF проводили методом термодинамического моделирования с использованием программы TERRA с базой термодинамических данных ИВТАНТЕРМО. Расчетами, выполненными для

вышеуказанных экспериментальных условий, установлено, что концентрация молекул GaF в пламени ацетилен-воздух увеличивается с ростом концентрации ионов галлия в анализируемых растворах до 35 г/л, причем, в отличие от экспериментальных данных, не наблюдается насыщения. Это объясняется тем, что полному связыванию фтора в молекулы GaF препятствуют процессы гидролиза (образование GaOH и Ga₂O). Степень связывания F в молекулы GaF не слишком высока из-за более эффективного образования в данном пламени молекул HF. Теоретическая градуировочная функция для определения фтора соответствует экспериментальной.

В работе [3] найдены оптимальные условия определения фтора по молекулярному поглощению компоненты полосы AlF (227.66 нм) в пламенах ацетилен-дinitрооксид (расход ацетилена - 220 л/час, расход дinitрооксида - 324 л/час) и ацетилен-воздух-ацетилен (расход ацетилена 65 л/час, расход воздуха 400 л/час) с помощью аналогичного прибора. Полученные термодинамическим моделированием для заданных экспериментальных условий зависимости концентрации молекул AlF в пламени дinitрооксид-ацетилен от концентрации алюминия (постоянная концентрация фтора) и концентрации фтора (постоянная концентрация алюминия) в анализируемых растворах соответствуют экспериментальным зависимостям сигналов поглощения AlF от концентрации указанных элементов в пробах

1. Huang M.D., Becker-Ross H., Florek S., Heitmann U., Okruss M. // Determinations of halogens via molecules in the air-acetylene flame using high-resolution continuum source absorption spectrometry: Part I. Fluorine // Spectrochim. Acta. Part B. 2006. V. 61. P. 572-578.

2. Пупышев А.А. Атомно-абсорбционный спектральный анализ. М.: Техносфера, 2009. 784 с.

3. Acker J. and Bucker S. Determination of non-metals by means of high resolution continuum source AAS.